

A
B 448

На правах рукописи

В.А.

ВИЛИСОВА Елена Анатольевна

**СВЕТОИНДУЦИРОВАННЫЙ ДРЕЙФ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ
В КАНАЛАХ**

01.04.14 – теплофизика и молекулярная физика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научная библиотека
Уральского
Государственного
Университета

Екатеринбург, 2000

Работа выполнена на кафедре общей и молекулярной физики Уральского государственного университета им. А.М.Горького

Научный руководитель – доктор физико-математических наук,
профессор В.Г.Черняк.

Официальные оппоненты – доктор физико-математических наук,
профессор В.Д.Селезнев,
– кандидат физико-математических наук,
доцент А.В.Полтавец.

Ведущая организация – Институт теплофизики УрО РАН.

Защита состоится 2000 года
в _____ час. _____ мин. на заседании диссертационного совета Д063.78.07
по защите диссертаций на соискание ученой степени доктора физико-математических наук в Уральском государственном университете им. А.М. Горького по адресу: 620083, г.Екатеринбург, К-83, проспект Ленина, 51, комн. 248.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Уральского государственного университета им. А.М. Горького.

Автореферат разослан " _____ " _____ 2000г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук



Н.В.Баранов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Светоиндуцированный дрейф (СИД) разреженных газов заключается в возникновении макроскопического потока газа под действием света, поглощаемого частицами (атомами или молекулами) селективно по их скоростям. С тех пор, как в 1979 году СИД был предсказан теоретически [1], началось интенсивное исследование этого эффекта. Экспериментальные наблюдения показали, что явление СИД универсально в том смысле, что оно реализуется в типичных экспериментальных условиях и присуще широкому классу объектов: атомам, молекулам и ионам.

Явление светоиндуцированного дрейфа привлекло внимание многих исследователей благодаря тому, что оно существенно расширяет возможности исследования неравновесных свойств газов, позволяет получить сведения о сечениях столкновений возбужденных атомов и молекул, о параметрах взаимодействия возбужденных частиц с поверхностями твердых тел.

Изучение явления светоиндуцированного дрейфа представляет интерес и в связи с его возможным практическим применением. СИД может использоваться для разделения изотопов, для обнаружения и исследования веществ в малых количествах (СИД собирает микропримесь со всего объема и повышает этим эффективность регистрации). С помощью резонансного оптического излучения можно управлять процессами диффузии и теплопереноса в газах и тем самым оптимизировать многие технологические процессы. Также светоиндуцированный дрейф может использоваться в микро- и нанотехнологии (при дозировке микропримесей).

До недавнего времени существующие теоретические модели СИД носили лишь качественный характер. По сути, при разработке этих моделей ставилась задача понять механизмы этого явления. Первоначально был обоснован объемный (буферный) механизм светоиндуцированного дрейфа, возможный только при наличии буферного (не взаимодействующего с излучением) газа. При этом рассматривался безграничный пространственно однородный газ. Позднее был рассмотрен поверхностный механизм СИД однокомпонентного газа в каналах в условиях свободно-молекулярного и гидродинамического режимов.

Заметим, что ни одна из существующих теорий не описывала экспериментальные данные по скорости СИД разреженных газов в капиллярах в зависимости от давления не только количественно, но и качественно. Очевидно, теория, адекватная условиям реального эксперимента, учиты-

вающая все основные механизмы СИД, должна быть основана на решении газокинетических уравнений Больцмана с подходящими граничными условиями. Построению такой теории явления СИД посвящена настоящая работа.

Работа выполнялась по планам научных исследований, проводимых на кафедре общей и молекулярной физики Уральского государственного университета. Работа поддерживалась грантами Международного научного фонда (RG4000 и RG4300), Российского фонда фундаментальных исследований (№ 96-01-00756 и № 99-01-00143) и грантом "Университеты России – фундаментальные исследования" (№ 472).

Цель работы состояла

- в разработке молекулярно-кинетической теории явления светоиндуцированного дрейфа однокомпонентного газа и бинарной газовой смеси в каналах при любых значениях числа Кнудсена (Kn);
- в описании экспериментальных данных по светоиндуцированной разности давлений и светоиндуцированному разделению бинарной газовой смеси в капилляре, и в разработке методики восстановления параметров взаимодействия возбужденных частиц с невозбужденными частицами поглощающего газа и с частицами буферного газа, а также с граничной поверхностью.

Научная новизна работы состоит в том, что в ней впервые

- раскрыты поверхностный и столкновительный механизмы СИД однокомпонентного газа на основе решения кинетических уравнений Больцмана во всем диапазоне чисел Kn ;
- показано, что столкновительный механизм СИД однокомпонентного газа является определяющим, так как именно он дает основной вклад в описание экспериментальной зависимости скорости СИД от числа Kn ;
- на основе решения кинетических уравнений Больцмана во всем диапазоне чисел Kn раскрыты поверхностный и объемный (буферный) механизмы СИД бинарной газовой смеси;
- показана возможность и проведено исследование светоиндуцированного движения газовой смеси как целого.

Научная и практическая ценность работы. Полученные результаты

- предоставляют новые возможности и расширяют область исследований неравновесных свойств газов;
- могут служить основой для разработки принципиально новых методов разделения газовых смесей и изотопов в лабораторных условиях;

– могут быть использованы для экспериментального изучения параметров взаимодействия возбужденных частиц поглощающего газа с невозбужденными частицами, с буферными частицами и с граничной поверхностью.

Автор выносит на защиту:

1. теорию явления светоиндуцированного дрейфа однокомпонентного газа в плоском и цилиндрическом каналах при произвольных значениях числа Kn ;
2. теорию явления светоиндуцированного дрейфа бинарной газовой смеси в цилиндрическом канале при произвольных значениях числа Kn ;
3. описание экспериментальных данных по светоиндуцированной разности давлений для однокомпонентного газа CH_3F и светоиндуцированному разделению бинарной газовой смеси (пары Na - инертные газы) в капилляре и восстановление параметров взаимодействия возбужденных частиц с невозбужденными, с буферными частицами и с граничной поверхностью.

Апробация работы. Результаты исследований были представлены на научно-технической конференции "Вакуумная наука и техника" (Гурзуф, 1994), 3-м Международном форуме по тепломассообмену (Минск, 1996), Международной конференции "Неравновесные процессы в соплах и струях" (Москва, 1995), 18-м, 19-м, 20-м и 21-м Международных симпозиумах по динамике разреженного газа (Канада, 1992; Великобритания, 1994; Китай, 1996; Франция, 1998).

Публикации. Основное содержание диссертации отражено в 12 научных публикациях, список которых приводится в конце автореферата.

Объем и структура работы. Диссертация содержит 177 страниц машинописного текста, включая рисунки, приложения, таблицы и список литературы, состоящий из 75 наименований. Основной текст диссертации изложен на 140 страницах и состоит из введения, трех глав и заключения (основные результаты и выводы).

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении сформулирована цель работы, кратко обоснована ее актуальность, научная новизна и практическое значение.

В первой главе проводится краткий анализ имеющихся теоретических и экспериментальных работ по светоиндуцированному дрейфу. Рассматриваются основные механизмы, предложенные для описания явления СИД: поверхностный, объемный (буферный) и столкновительный.

Обсуждаются квазиклассические модели взаимодействия газовой среды с излучением. Излучение рассматривается в виде бегущей монохроматической волны. Газовая среда моделируется частицами, поступательное движение которых описывается законами классической динамики, а внутренние состояния – законами квантовой механики. Предполагается, что частицы могут находиться в двух энергетических состояниях: основном (невозбужденном) – n и возбужденном – m . Для описания взаимодействия резонансного излучения (частота близка к частоте перехода m - n частиц газа) с газовой средой используется аппарат матрицы плотности. Уравнения для элементов матрицы плотности дополняются релаксационными членами. Осуществляется переход от матрицы плотности к функциям распределения частиц компонентов газовой смеси по скоростям. В результате записывается система кинетических уравнений для функций распределения возбужденных f_m и невозбужденных f_n частиц поглощающего газа и буферных f_2 частиц:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_n}{\partial t} + \vec{v}_1 \nabla f_n &= \frac{1}{2} \Gamma_m \kappa(\vec{v})(f_m - f_n) + \Gamma_m f_m + S_n, \\ \frac{\partial f_m}{\partial t} + \vec{v}_1 \nabla f_m &= -\frac{1}{2} \Gamma_m \kappa(\vec{v})(f_m - f_n) - \Gamma_m f_m + S_m, \\ \frac{\partial f_2}{\partial t} + \vec{v}_2 \nabla f_2 &= S_2,\end{aligned}\quad (1)$$

где

$$\begin{aligned}\kappa(\vec{v}) &= \frac{4|G_{mn}|^2 \Gamma}{\Gamma_m (\Gamma^2 + (\Omega - \vec{k} \vec{v}_1)^2)}, \\ G_{mn} &= \frac{d_{mn} E_0}{2\hbar}, \quad S_i = \sum_j S_{ij}, \quad i, j = m, n, 2,\end{aligned}$$

\vec{v}_i – скорость частиц i -го компонента газовой смеси, $\kappa(\vec{v})$ – параметр насыщения, характеризующий вероятность индуцированных переходов и пропорциональный интенсивности излучения I , d_{mn} – дипольный момент перехода m - n , E_0 – амплитуда напряженности электрического поля, Γ – однородная полуширина линии поглощения, Γ_m – постоянная радиационного распада m -уровня, \vec{k} – волновой вектор, Ω – отстройка частоты излучения ω от центра линии поглощения ω_{mn} ($\Omega = \omega - \omega_{mn}$), \hbar – постоянная Планка, S_{ij} – больцмановские интегралы столкновений между частицами i -го и j -го сортов. Уравнения (1) не учитывают световое давление. Здесь и далее нижний индекс $i = m, n$ относится соответственно к возбужден-

ным и невозбужденным частицам поглощающего газа, $i = 2$ — к частицам буферного газа.

Обсуждаются условия, допускающие линеаризацию кинетических уравнений (1). В качестве линеаризованных интегралов столкновений используется аппроксимирующий интеграл второго порядка [2]. Столкновения между частицами считаются упругими.

В качестве граничных условий к кинетическим уравнениям принимается зеркально-диффузная модель Максвелла, в которой предполагается, что при упругом взаимодействии со стенкой доля ϵ_i частиц i -го сорта рассеивается в каждой точке поверхности диффузно с максвелловским распределением по скоростям, а доля $(1 - \epsilon_i)$ — отражается зеркально. Коэффициенты аккомодации возбужденных ϵ_m и невозбужденных ϵ_n частиц различны.

Обсуждается интегрально-моментный метод решения линеаризованных кинетических уравнений.

Во второй главе исследуется светоиндуцированный дрейф однокомпонентного газа в плоском канале и цилиндрическом капилляре. Полагается, что длина каналов много больше их поперечного размера. Излучение направлено вдоль оси канала z . Рассматривается случай оптически тонкой среды, для которой излучение слабо поглощается на длине канала. Интенсивность излучения считается однородной в поперечном сечении канала. Величина интенсивности излучения полагается умеренной, так что состояния возбужденного и невозбужденного компонентов газовой смеси можно считать слабо неравновесными и пользоваться линеаризованными кинетическими уравнениями (в этих уравнениях сохранены лишь члены основного порядка по малому параметру n_m/n_n , где n_m и n_n — концентрация возбужденных и невозбужденных частиц соответственно).

Вводится частотный параметр Γ_{mn} , характеризующий отношение частоты Γ_m радиационного распада возбужденного уровня частиц к частоте γ_n столкновений невозбужденных частиц: $\Gamma_{mn} = \Gamma_m/\gamma_n$. Оценки показывают, что для молекулярных газов при давлении $p > 0,1$ Па параметр Γ_{mn} можно считать малым (для атомарных газов это справедливо при более высоких давлениях). Полагается, что $\Gamma_{mn} \ll 1$.

С учетом принятых предположений линеаризованные кинетические уравнения (1) (без последнего уравнения для буферного газа) преобразуются в замкнутую систему интегрально-моментных уравнений для парциальных макроскопических скоростей U_i и тензоров напряжений. Эти

уравнения решаются методом Бубнова-Галеркина с выбором подходящих пробных функций, которые обеспечивают точность полученных результатов с максимальной ошибкой в зависимости от числа Kn не более 4%.

Практический интерес представляет расчет усредненного по поперечному сечению канала макроскопического потока газа, который определяется следующим выражением:

$$J = \frac{1}{S} \int (n_n U_n + n_m U_m) dS \quad (2)$$

и характеризует число частиц, проходящих через единичное поперечное сечение канала в единицу времени (здесь S – площадь поперечного сечения канала).

Вводится безразмерный коэффициент G , который связан с размерным светоиндуцированным потоком газа в капилляре J следующим соотношением:

$$J = \frac{n R_0 \Gamma_m \kappa}{2\sqrt{\pi}} G, \quad (3)$$

где параметр насыщения κ определен выражением

$$\kappa = \int_{-\infty}^{+\infty} c_z \exp(-c_z^2) \kappa(\vec{v}) d\vec{c}_z, \quad \vec{c} = \frac{\vec{v}}{\bar{v}}, \quad \bar{v} = \left(\frac{2k_B T}{m} \right)^{1/2}, \quad (4)$$

\vec{c} – безразмерная скорость частиц, m – масса частиц, n – концентрация газовых частиц, T – температура газа, k_B – постоянная Больцмана. Для плоского канала в соотношении (3) радиус капилляра R_0 заменяется на величину зазора канала d . Величина κ , зависящая от параметров $\Gamma/(k\bar{v})$ и $\Omega/(k\bar{v})$, может быть рассчитана численно, а в случаях неоднородного $\Gamma \ll (k\bar{v})$ и однородного $\Gamma \gg (k\bar{v})$ уширений имеет простой вид. Существенно, что κ является антисимметричной функцией отстройки Ω .

Возбужденные и невозбужденные частицы газа моделируются твердыми сферами с эффективными диаметрами d_m и d_n соответственно. Известно, что относительное различие этих диаметров мало, а коэффициенты аккомодации частиц газа на реальных поверхностях близки к единице, то есть

$$\Delta d/d_n \ll 1, \quad \Delta d = d_m - d_n, \quad (1 - \varepsilon_i) \ll 1, \quad i = m, n. \quad (5)$$

Введение в теорию малых параметров (5) после соответствующей линеаризации задачи позволяет разделить поверхностный механизм, обусловленный различным взаимодействием возбужденных и невозбужденных

частиц газа со стенками канала, и столкновительный механизм СИД, обусловленный различием сечений столкновений этих частиц. В линейном приближении по малым параметрам (5) коэффициент G преобразуется к виду:

$$G = G^{(1)} \Delta \varepsilon + G^{(2)} \Delta d/d_n, \quad \Delta \varepsilon = \varepsilon_n - \varepsilon_m. \quad (6)$$

Здесь $G^{(1)}$ и $G^{(2)}$ – кинетические коэффициенты, характеризующие соответственно поверхностную и столкновительную составляющую светоиндуцированного дрейфа газа и зависящие только от числа Kn . При промежуточных значениях Kn кинетические коэффициенты рассчитаны численно. Соответствующие зависимости для капилляра показаны на рис.1, где R – параметр разреженности газа, обратно пропорциональный числу Kn . Для молекул – твердых сфер соотношение между R и Kn при движении газа в капилляре имеет вид:

$$R = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} Kn^{-1}, \quad Kn = \frac{l_n}{R_0}. \quad (7)$$

Здесь l_n – средняя длина свободного пробега невозбужденных частиц.

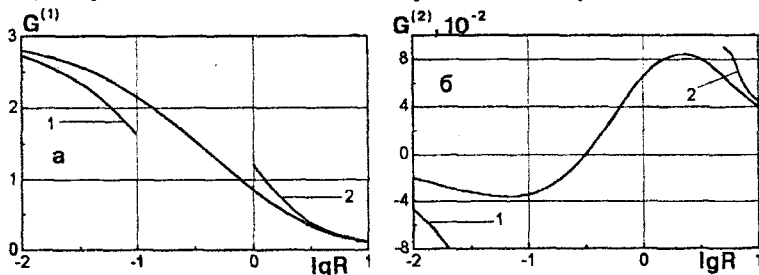


Рис.1. Зависимость кинетических коэффициентов $G^{(1)}$ (а) и $G^{(2)}$ (б) от параметра разреженности R для СИД в капилляре; 1 – формулы (8), 2 – формулы (9).

Аналитические выражения для $G^{(1)}$ и $G^{(2)}$ удастся получить лишь при больших и малых значениях числа Kn . Для капилляра эти выражения имеют вид:

1. Почти свободномолекулярный режим ($Kn \gg 1$ или $R \ll 1$):

$$G^{(1)} = \frac{16}{3\sqrt{\pi}} + 6R \ln R, \quad G^{(2)} = R \ln R. \quad (8)$$

2. Гидродинамический режим со скольжением ($Kn \ll 1$ или $R \gg 1$):

$$G^{(1)} = \frac{6}{5R}, \quad G^{(2)} = \frac{9}{20R}. \quad (9)$$

Как видно на рис.1, кинетический коэффициент $G^{(2)}$ при $R \approx 0,32$ меняет знак. Следовательно, направление столкновительной составляющей СИД определяется не только знаками отстройки Ω и разности эффективных диаметров возбужденных и невозбужденных частиц Δd , но и давлением газа в канале.

Кинетический коэффициент $G^{(1)}$ всегда положителен. Поэтому направление поверхностной составляющей СИД определяется знаками отстройки Ω и разности $\Delta \epsilon$ коэффициентов аккомодации невозбужденных и возбужденных частиц.

Рассмотрено явление светоиндуцированной разности давлений (СРД) в закрытой кювете. Под воздействием резонансного излучения, направленного вдоль оси капилляра, соединяющего два резервуара, возникает СИД, в результате которого происходит перераспределение давления газа в системе. Продольный градиент давления вызывает пуазейлевый поток. В стационарном состоянии усредненные по сечению канала светоиндуцированный и пуазейлевый потоки компенсируют друг друга. Для возникшего при этом перепада давлений в резервуарах получено соотношение:

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{\Delta I \varphi(\Omega)}{n \hbar \omega \bar{v}} P, \quad \Delta p = p_L - p_0, \quad \Delta I = I_0 - I_L, \quad (10)$$

где p_0 , p_L – давления в резервуарах; I_0 , I_L – интенсивности излучения на входе и на конце капилляра, p – среднее давление газа в системе; $\varphi(\Omega)$ – антисимметричная функция отстройки Ω , связанная с параметром насыщения κ . Величина P линейризуется по малым параметрам (5):

$$P = P^{(1)} \Delta \epsilon + P^{(2)} \frac{\Delta d}{d_n}, \quad P^{(i)} = G^{(i)} / G_p, \quad (11)$$

где G_p – безразмерный кинетический коэффициент, характеризующий пуазейлевый поток газа в капилляре.

Выражения для кинетических коэффициентов $P^{(1)}$ и $P^{(2)}$ при больших и малых значениях числа Kn имеют вид:

1. Почти свободномолекулярный режим ($Kn \gg 1$ или $R \ll 1$):

$$P^{(1)} = 4 + \frac{9\sqrt{\pi}}{2} R \ln R, \quad P^{(2)} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} R \ln R. \quad (12)$$

2. Гидродинамический режим со скольжением ($Kn \ll 1$ или $R \gg 1$):

$$P^{(1)} = \frac{48}{5R^2}, \quad P^{(2)} = \frac{18}{5R^2}. \quad (13)$$

Результаты численного расчета кинетических коэффициентов $P^{(1)}$ и $P^{(2)}$ в промежуточном режиме представлены на рис.2.

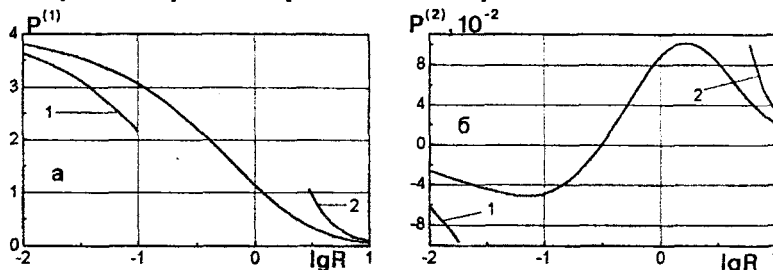


Рис.2. Зависимость кинетических коэффициентов $P^{(1)}$ (а) и $P^{(2)}$ (б) от параметра разреженности R для СРД в капилляре; 1 – формулы (12), 2 – формулы (13).

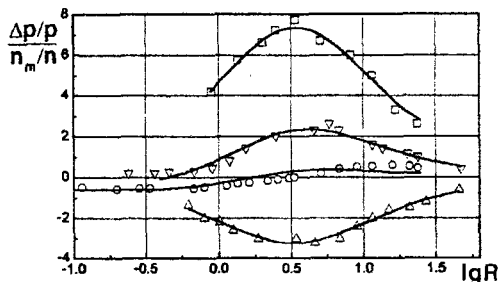


Рис.3. Сравнение теории (сплошные линии) с экспериментом [3] по СРД; 1(□) – ветвь $P(24,13)$, 2(▽) – $Q(12,3)$, 3(○) – $R(4,3)$, 4(Δ) – $R(31,9)$.

Проведено сопоставление теории СРД с экспериментальными данными, полученными на молекулах CH_3F [3]. Измерения проводились на переходах $R(4,3)$, $R(31,9)$, $P(24,13)$ и $Q(12,3)$ молекулы CH_3F . Давление газа в капилляре длины $L = 30$ см варьировалось в пределах от 0,67 Па до 277 Па, что соответствует значениям параметра разреженности $R = 0,11 \div 47,2$. Сравнение теории с экспериментом показано на рис.3 для безразмерной величины $(\Delta p/p)/(n_m/n)$, где

$$\frac{n_m}{n} = \frac{\Delta I}{\hbar \omega n L} \left(\frac{\bar{v}}{2R_0} + \gamma_n \right)^{-1}. \quad (14)$$

Теоретические кривые на рис.3 соответствуют следующему выражению:

$$\frac{\Delta p/p}{n_m/n} = \frac{L}{R_0} \varphi(\Omega) \left(\frac{1}{2} + R \right) \left(P^{(1)} \Delta \varepsilon + P^{(2)} \frac{\Delta d}{d_n} \right). \quad (15)$$

Из требования наилучшего согласия теории с экспериментом извлекались неизвестные параметры $\varphi(\Omega)\Delta\varepsilon$ и $\varphi(\Omega)\Delta d/d_n$. Полученные значения приведены в таблице 1. Здесь же приведены экспериментальные величины Ω и рассчитанные значения $\varphi(\Omega)$. Неопределенность значений $\varphi(\Omega)$ связана с тем, что эта функция зависит от величины Γ – однородной полуширины линии поглощения, значение которой в работе [3] не приведено. Поэтому для параметров $\Delta\varepsilon$ и $\Delta d/d_n$ можно указать лишь интервалы значений, которые они могут принимать.

Ветвь	$\Omega/2\pi$, МГц; линия CO_2	$\varphi(\Omega)$	$\varphi(\Omega)\Delta\varepsilon$, 10^{-4}	$\varphi(\Omega)\Delta d/d_n$, 10^{-4}	$\Delta\varepsilon$, 10^{-3}	$\Delta d/d_n$, 10^{-3}
$R(4,3)$ $^{13}CH_3F$	25,8 9P(32)	0,49	-8,72	60,2	-1,78	12,3
$R(31,9)$ $^{13}CH_3F$	121 9R(6)	$0,31 \div$ $\div 0,39$	-15,8	-201	$-(4,05 \div$ $\div 5,1)$	$-(51,5 \div$ $\div 64,8)$
$Q(12,3)$ $^{12}CH_3F$	-207 9P(20)	$-(0,18 \div$ $\div 0,19)$	-3,07	201	$1,62 \div$ $\div 1,71$	$-(106 \div$ $\div 112)$
$P(24,13)$ $^{13}CH_3F$	-52 10R(30)	$-(0,49 \div$ $\div 0,75)$	31,4	474	$-(4,19 \div$ $\div 6,41)$	$-(63,2 \div$ $\div 96,7)$

Таблица 1. Экспериментальные параметры для молекул CH_3F .

Теоретические кривые, соответствующие формуле (15) с приведенными в таблице 1 значениями параметров $\Delta\varepsilon$ и $\Delta d/d_n$, удовлетворительно описывают экспериментальные данные во всем диапазоне давлений. Исключение составляет лишь переход $R(4,3)$, для которого СРД хорошо описывается теорией в почти свободномолекулярном и промежуточном режимах, но имеется заметное расхождение при $Kn < 1$.

В третьей главе исследуется светоиндуцированный дрейф бинарной газовой смеси в длинном капилляре с учетом поверхностного (аккомодационного) механизма и объемного (буферного) механизма, обусловленного различием сечений столкновений возбужденных и невозбужденных частиц поглощающего газа с частицами буферного газа. Бинарная газовая смесь, один из компонентов которой взаимодействует с резонансным излучением, рассматривается как трехкомпонентная смесь, состоящая из возбужденного, невозбужденного и буферного компонентов. При постановке задачи были приняты те же предположения, что и во второй главе. Для описания газовой смеси используются кинетические уравнения (1), линеаризованные относительно соответствующих функций возмущения. Кроме того, полагается, что концентрация поглощающих частиц много

меньше концентрации буферных частиц: $n_1 \ll n_2$. В этом случае можно не учитывать столкновения между частицами поглощающего газа и считать, что эффект светоиндуцированного дрейфа обусловлен только объемным (буферным) и поверхностным (аккомодационным) механизмами. В линеаризованных кинетических уравнениях сохранены лишь члены основного порядка по малым параметрам n_m/n_n , n_m/n_2 и n_n/n_2 . Задача о СИД бинарной газовой смеси рассматривалась при произвольном значении частотного параметра Γ_{mn} , который определяется отношением частоты Γ_m радиационного распада возбужденного уровня к частоте γ_n столкновений невозбужденных частиц в газовой смеси.

Линеаризованные кинетические уравнения (1) с аппроксимирующими интегралами столкновений преобразуются в замкнутую систему интегрально-моментных уравнений для макроскопических скоростей и напряжений компонентов газовой смеси, которые решаются методом Бубнова-Галеркина.

Рассчитываются усредненные по поперечному сечению капилляра макроскопические потоки поглощающего J_1 и буферного J_2 газов

$$J_i = \frac{1}{S} \int_{(S)} n_i U_i r \, dr, \quad i = 1, 2, \quad n_1 U_1 = n_n U_n + n_m U_m, \quad (16)$$

а также среднечисловой поток газовой смеси в целом $J = J_1 + J_2$. Здесь и далее нижние индексы 1 и 2 нумеруют величины, относящиеся соответственно к поглощающему и буферному компоненту. Из закона сохранения импульса следует, что в случае неограниченного газа гидродинамический (среднемассовый) поток всей газовой смеси равен нулю. Этот факт использовался в предшествующих теориях СИД. Однако наличие межфазной поверхности, как и в случае однокомпонентного газа, изменяет полный импульс смеси, стимулируя ее макроскопический поток. Поэтому следует определить не только парциальные потоки поглощающего и буферного газов, но и поток газовой смеси в целом.

Численный расчет проводится для безразмерных кинетических коэффициентов G_i , которые связаны с потоками J_i соотношениями:

$$J_i = \frac{n_1 R_0 \Gamma_m \kappa}{2\sqrt{\pi}} G_i. \quad (17)$$

Величина $G = G_1 + G_2$ характеризует усредненный по сечению капилляра безразмерный светоиндуцированный поток всей газовой смеси.

Рассматривается случай почти диффузного рассеяния частиц поглощающего и буферного газов на поверхности капилляра:

$$1 - \varepsilon_i \ll 1, \quad i = m, n, 2. \quad (18)$$

Частицы газовой смеси моделируются твердыми сферами с эффективными диаметрами d_i ($i = m, n, 2$), причем диаметры возбужденных и невозбужденных частиц мало различимы, то есть

$$\frac{\Delta d}{d_{n2}} \ll 1, \quad \Delta d = d_m - d_n = 2(d_{m2} - d_{n2}), \quad d_{ij} = \frac{d_i + d_j}{2}. \quad (19)$$

Линеаризация по малым параметрам (18), (19) позволяет разделить объемный (буферный) и поверхностный механизмы СИД. Величины G_1 и G_2 записываются в следующем виде:

$$G_1 = G_1^{(1)} \Delta \varepsilon + G_1^{(2)} \frac{\Delta d}{d_{n2}}, \quad (20)$$

$$G_2 = G_2^{(1)} \Delta \varepsilon + G_2^{(2)} \frac{\Delta d}{d_{n2}}, \quad \Delta \varepsilon = \varepsilon_n - \varepsilon_m. \quad (21)$$

Здесь $G_k^{(1)}$ и $G_k^{(2)}$ ($k = 1, 2$) – кинетические коэффициенты, характеризующие соответственно поверхностный и объемный (буферный) механизмы потоков поглощающего (СИД) и буферного газов. Для всей газовой смеси имеем

$$G = G^{(1)} \Delta \varepsilon + G^{(2)} \frac{\Delta d}{d_{n2}}, \quad G^{(j)} = G_1^{(j)} + G_2^{(j)}, \quad j = 1, 2. \quad (22)$$

Кинетические коэффициенты $G_1^{(1)}$ и $G_1^{(2)}$ зависят от числа Kn , частотного параметра Γ_{mn} и отношения масс m_1/m_2 частиц поглощающего и буферного газов. Кинетические коэффициенты $G_2^{(1)}$ и $G_2^{(2)}$, относящиеся к буферному газу, зависят кроме вышеперечисленных параметров и от отношения эффективных диаметров d_n/d_2 частиц поглощающего и буферного газов. В предельных по числу Kn режимах для $G_1^{(1)}$, $G_1^{(2)}$, $G_2^{(1)}$ и $G_2^{(2)}$ получены аналитические выражения, а в промежуточном режиме проведен численный расчет.

На рис.4 показаны зависимости кинетических коэффициентов $G_1^{(1)}$ и $G_1^{(2)}$ от параметра разреженности R при различных значениях частотного параметра Γ_{mn} для случая $m_1/m_2 \sim 1$. Здесь R – параметр разреженности газовой смеси, обратно пропорциональный числу Kn :

$$R = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right) \frac{1}{Kn}, \quad Kn = \frac{l_n}{R_0}, \quad (23)$$

где l_n — средняя длина свободного пробега невозбужденных частиц поглощающего газа в газовой смеси.

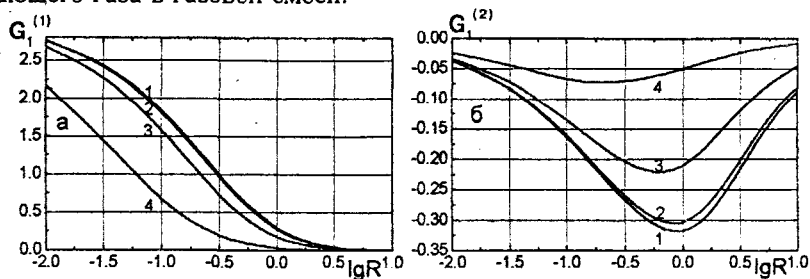


Рис.4. Зависимости кинетических коэффициентов $G_1^{(1)}$ (а) и $G_1^{(2)}$ (б) от параметра разреженности R ($m_1/m_2 \sim 1$): 1 — $\Gamma_{mn} = 0,01$; 2 — $\Gamma_{mn} = 0,1$; 3 — $\Gamma_{mn} = 1$; 4 — $\Gamma_{mn} = 10$.

Установлено, что при значениях частотного параметра $\Gamma_{mn} \leq 0,1$ кинетические коэффициенты $G_1^{(1)}$ и $G_1^{(2)}$ слабо зависят от Γ_{mn} .

Исследована зависимость кинетических коэффициентов $G_1^{(1)}$ и $G_1^{(2)}$ от отношения молекулярных масс m_1/m_2 . Эта зависимость оказалась слабой и существенной лишь в промежуточном режиме ($Kn \sim 1$), где для разных соотношений молекулярных масс максимальное расхождение между значениями $G_1^{(1)}$ составляет около 17%, а между значениями $G_1^{(2)}$ около 16%. Зависимость скорости светоиндуцированного дрейфа от масс молекул проявляется главным образом через параметр разреженности R .

Величины $G_i^{(k)}$ зависят от параметра $C = R\Gamma_{mn}$, который определяется только микроскопическими характеристиками поглощающего газа, его температурой и радиусом капилляра R_0 :

$$C = R\Gamma_{mn} = \frac{R_0\Gamma_m}{\bar{v}_1}, \quad \bar{v}_1 = \left(\frac{2k_B T}{m_1} \right)^{1/2}. \quad (24)$$

Этот параметр характеризует отношение среднего времени свободного пролета частицы через поперечное сечение канала к времени жизни этой частицы в возбужденном состоянии.

На рис.5 приведены зависимости кинетических коэффициентов $G_i^{(k)}$ от параметра разреженности R для смеси паров натрия с гелием при значении $C \approx 58,9$, что соответствует условиям эксперимента [4]. Отметим, что светоиндуцированный среднемассовый поток газовой смеси в капилляре отличен от нуля, тогда как в безграничном газе в соответствии с законом сохранения импульса он отсутствует.

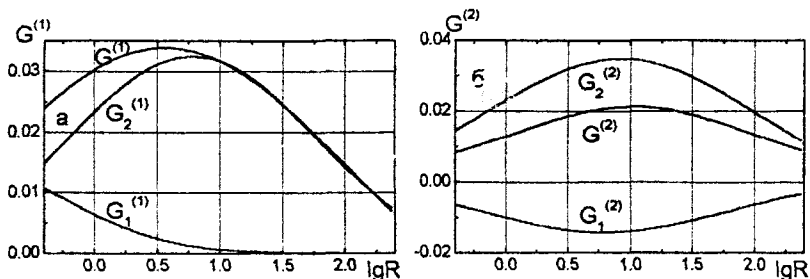


Рис.5. Зависимости кинетических коэффициентов $G_1^{(1)}$, $G_2^{(1)}$, $G^{(1)}$ (а) и $G_1^{(2)}$, $G_2^{(2)}$, $G^{(2)}$ (б) от параметра разреженности R для газовой смеси $Na-He$ при значении $C \approx 58,9$.

Рассматривается явление светоиндуцированного разделения бинарной газовой смеси. Приводятся соотношения, позволяющие рассчитать скорость СИД через перепад концентрации поглощающего газа, установившийся вдоль экспериментальной ячейки с газовой смесью. В этих соотношениях используется закон Фика для диффузионного потока поглощающего газа с учетом поправочного множителя S^* , зависящего от числа Kn :

$$\vec{J}_{d1} = -S^* n D \nabla(n_1/n), \quad D = \frac{\bar{v}_1^2}{2\gamma_{12}}, \quad (25)$$

где γ_{12} – частота столкновений между поглощающими и буферными частицами, D – коэффициент взаимной диффузии. Для произвольных чисел Kn множитель S^* рассчитан численно, а при $Kn \ll 1$ и $Kn \gg 1$ получены аналитические выражения. Приводится методика восстановления параметров, характеризующих взаимодействие возбужденных и невозбужденных частиц поглощающего газа с граничной поверхностью и с частицами буферного газа, из экспериментов по светоиндуцированному разделению бинарных газовых смесей. Извлечение этих параметров проведено для атомов Na , находящегося в смеси с инертными газами (He , He , Ar).

На рис.6 показано сопоставление теории с экспериментальными значениями величины скорости СИД для смесей $Na-He$ [4], $Na-Xe$ [5] и $Na-Ar$ [5]. Теоретические кривые соответствуют выражению

$$\vec{U} = \frac{R_0 \Gamma_m \kappa}{2\sqrt{\pi}} \left(G_1^{(1)} \Delta \varepsilon + G_1^{(2)} \frac{\Delta d}{dn_2} \right) \vec{e}_z. \quad (26)$$

Эксперименты [4] проводились на D_2 -линии поглощения атомов натрия, помещенного в среду He . При $\Omega > 0$ происходил дрейф паров натрия в сторону, противоположную направлению излучения. Давление газа в капилляре изменялось от 21 Па до 12,5 кПа. При этом параметр разреженности R увеличивался от 0,4 до 240, а частотный параметр Γ_{mn} уменьшался от значения 146 до 0,25.

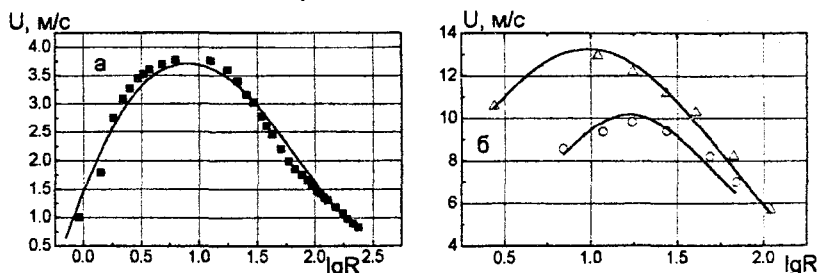


Рис.6. Сравнение теории (сплошные линии) с экспериментом: (а) для газовой смеси $Na-He$ [4], (б) для газовых смесей $Na-Xe$ (Δ) и $Na-Ar$ (\circ) [5].

Наилучшее согласие теории с экспериментом имеет место при следующих значениях параметров:

для смеси $Na-He$	$\Delta\epsilon = 3,07 \cdot 10^{-3}$,	$\Delta d/d_{n2} = 4,05 \cdot 10^{-3}$,
для смеси $Na-Ar$	$\Delta\epsilon = 7,33 \cdot 10^{-2}$,	$\Delta d/d_{n2} = 1,36 \cdot 10^{-2}$,
для смеси $Na-Xe$	$\Delta\epsilon = 1,79 \cdot 10^{-2}$,	$\Delta d/d_{n2} = 1,48 \cdot 10^{-2}$.

Теория удовлетворительно описывает эксперимент при любых давлениях газа в капилляре.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработана молекулярно-кинетическая модель явления светоиндуцированного дрейфа (СИД) однокомпонентного газа и бинарной газовой смеси в каналах при произвольных числах Кнудсена (Kn).

2. Впервые обоснована возможность светоиндуцированного гидродинамического потока бинарной газовой смеси в капиллярах и проведено его исследование.

3. Показано, что светоиндуцированный дрейф газов в каналах обусловлен тремя механизмами: а) поверхностным, связанным с различным взаимодействием возбужденных и невозбужденных частиц поглощающего газа с граничной поверхностью, б) объемным (буферным), обусловленным различием сечений столкновений возбужденных и невозбужденных

частиц поглощающего газа с молекулами буферного газа, в) столкновительным, связанным с различием сечений столкновений возбужденных и невозбужденных частиц поглощающего газа между собой. В случае почти диффузного рассеяния частиц на стенках канала и при малом различии эффективных сечений столкновений возбужденных и невозбужденных частиц поглощающего газа эти механизмы разделяются.

4. Исследована зависимость от числа Kn поверхностной и столкновительной составляющих скорости СИД однокомпонентного газа, а также поверхностной и буферной составляющих парциальных потоков бинарной газовой смеси. Установлено, что кинетический коэффициент, характеризующий поверхностную составляющую СИД, при переходе от свободно-молекулярного к гидродинамическому режиму монотонно уменьшается. Присутствие буферного газа усиливает это уменьшение. Кинетический коэффициент, характеризующий столкновительную составляющую СИД однокомпонентного газа, при $Kn < 1$ имеет максимум, при $Kn \gg 1$ – минимум, а при промежуточных значениях Kn меняет знак. Кинетические коэффициенты, характеризующие объемную составляющую СИД, а также поверхностную и объемную составляющие скорости буферного газа, имеют немонотонную зависимость от числа Kn с одним экстремумом при промежуточных значениях Kn .

5. Установлено, что с увеличением отношения частоты радиационного распада возбужденного уровня поглощающих частиц к частоте их столкновений с буферными частицами скорости СИД бинарной газовой смеси монотонно убывает.

6. Показано, что направление поверхностных составляющих скорости поглощающего газа (СИД) и скорости буферного газа определяется знаками отстройки частоты излучения от центра линии поглощения и разности коэффициентов аккомодации невозбужденных и возбужденных частиц поглощающего газа. Направление столкновительной составляющей СИД однокомпонентного газа определяется не только знаками отстройки частоты излучения и разности эффективных сечений столкновений возбужденных и невозбужденных частиц, но и давлением газа в канале. Направление буферных составляющих скорости дрейфа компонентов газовой смеси определяется знаками отстройки частоты излучения и разности эффективных сечений столкновений возбужденных и невозбужденных частиц поглощающего газа с буферными частицами.

7. Разработана модель явления светоиндуцированной разности давлений (СРД) однокомпонентного газа в закрытом капилляре при любых

числах Кнудсена. Проведено сопоставление с экспериментальными данными для молекул CH_3F . Установлено, что столкновительный механизм является определяющим, так как именно он обуславливает немонотонную зависимость величины СРД от числа Kn , наблюдаемую в эксперименте.

8. На примере смесей паров Na с инертными газами (He , Ar , Xe) показано, что сравнение полученных теоретических результатов с экспериментальными данными по светоиндуцированному разделению бинарных газовых смесей в капиллярах позволяет восстановить значения коэффициентов аккомодации и потенциальных параметров возбужденных частиц газа.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гельмуханов Ф.Х., Шалагин А.М. *Светоиндуцированная диффузия газов* // Письма в ЖЭТФ, 1979, т.29, № 12, с.773–776.

2. McCormack F.J. *Construction of linearized kinetic models for gaseous mixtures and molecular gases* // Phys. Fluids, 1973, v.16, № 12, p.2095–2105.

3. Hoogeveen R.W.M., Van der Meer G.J., Hermans L.J.F. *Surface light-induced drift of CH_3F* // Phys. Rev. A, 1990, v.42, p.6471–6481.

4. Атутов С.Н., Ермолаев И.М., Шалагин А.М. *Исследование светоиндуцированного дрейфа паров натрия* // ЖЭТФ, 1987, т.92, № 4, с.1215–1227.

5. Атутов С.Н., Лесяк С., Подъячев С.П., Шалагин А.М. *Светоиндуцированный дрейф сгустка паров натрия* // Новосибирск, 1986 (Препринт/АН СССР, Сиб. отделение, ИАиЭ, № 321).

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ

1. Chernyak V.G., Chermnyaninov I.V., Vintovkina E.A. *Light-induced drift of a one-component gas* // 18-th Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Vancouver, Canada, 1992, Book of Abstracts.

2. Черняк В.Г., Винтовкина Е.А., Чермянинов И.В. *Светоиндуцированный дрейф однокомпонентного газа в капиллярах* // ЖЭТФ, 1993, т.103, вып.5, с.1571–1583.

3. Черняк В.Г., Чермянинов И.В., Вилисова Е.А., Субботин Е.А. *Светоиндуцированный дрейф однокомпонентного газа в плоском канале* // ПМТФ, 1994, № 5, с.73–83.

4. Chernyak V.G., Vilisova E.A., Subbotin E.A. *Light-induced drift of a one-component gas in a capillary* // 19-th Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Oxford, Great Britain, July, 1994, Proceedings, v.1, p.368-374.

5. Черняк В.Г., Вилисова Е.А., Субботин Е.А. *Светоиндуцированный дрейф однокомпонентного газа в капиллярах при произвольных числах Кнудсена* // Научно-техническая конференция с участием зарубежных специалистов "Вакуумная наука и техника", тезисы, Гурзуф, октябрь, 1994, с.52.

6. Chernyak V.G., Vilisova E.A., Subbotin E.A. *The theory of the light-induced drift of a one-component gas in a capillary* // Int. Confer. "Nonequilibrium processes in nozzles and jets", Moscow, June, 1995, Book of Abstracts.

7. Черняк В.Г., Вилисова Е.А. *Теория светоиндуцированного дрейфа бинарной газовой смеси в капилляре* // ЖЭТФ, 1995, т.107, вып.1, с.125-139.

8. Черняк В.Г., Вилисова Е.А. *СИД газовой смеси в капиллярах при произвольных числах Кнудсена* // Труды III международного форума по тепломассообмену, Минск, май, 1996, т.7, с.64-68.

9. Черняк В.Г., Вилисова Е.А. *К теории изотермического движения бинарной газовой смеси в капилляре* // ЖЭТФ, 1996, т.110, вып.1(7), с.150-162.

10. Chernyak V.G., Vilisova E.A. *Light-induced drift of a binary gas mixture in a capillaries* // 20-th Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Beijing, China, August, 1996, Book of Abstracts, G6.

11. Chernyak V.G., Vilisova E.A. *On the theory of light-induced drift of rarefied gases in capillaries* // 21-th Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Marseille, France, 1998, Book of Abstracts, v.2, p.209-210.

12. Черняк В.Г., Вилисова Е.А. *К теории светоиндуцированного дрейфа бинарной газовой смеси в капилляре* // ЖЭТФ, 1998, т.114, вып.5(11), с.1709-1722.

Подписано в печ. 27.01.2000г. Формат 60 x 84 1/6.

Печать офсетная. Бумага лито Зак. № 27

Уч.-изд. л. 1,0 Усл. печ. л. 1,0 Тир. 100

620083, Екатеринбург, К-83, пр. Ленина, 51. Типография УрГУ.